# Green関数と界面の理論(「Theory of Excitations on Ideal Surfaces」報告,基研短期研究会)



小野, 正利

# Green 関数と界面の理論

東日本学園大学教養　　小　野　正　利

Transfer Matrix及びScattering Matrix を用いての振動状態の計算の概略を紹介します。これらを用いる方が，Green関数を用いるよりも便利です。

## § 1. 序

Kerner[1]が電子状態を調べるために用いたTransfer Matrix をHori とAsahi[2]が格子振動系に適用したのは1957年です。このTransfer Matrix を用いての計算はMontroll とPotts[3]が計算したfixed end の境界条件の下での格子系の固有振動の表式を再現します。といっても，Hori とAsahi の行なった計算は，周期境界条件を用いての計算ですから，正確に一致しているというわけではありません。Transer Matrix の計算方法は，周期境界条件の場合には大変便利であり，固体内部にimpurityがrandomに入った場合の振動状態を調べるには適当な方法です。[2]

Transfer Matrix は，多次元への適用[4]も可能であり，又勿論free endも取り扱い得て，従って，表面の振動状態も調べることができます。他方，表面モードのみを扱う場合には，Scattering Matrix の方法がより便利であり，又Transfer Matrix とScattering Matrix とは等価であることは，既にFukuda[5]によって示されています。

## § 2. Transfer Matrix

N個のatomsが各々質量m を持ち，力定数K である一次元鎖の運動方程式は，

$$m\frac{d^2u(i)}{dt^2}=-K\ \{(u(i)-u(i-1))+(u(i)-u(i+1))\} \tag{1}$$

$$i=1,2,\cdots\cdots\cdots,N$$

であり，u(i)はi 番目のatomの変位です。今$y(i)\equiv u(i+1)-u(i)$を導入すると，(1)式は

$$-m\omega^2 u(i) = K\left(y(i) - y(i-1)\right) \tag{2}$$

と書け，更に

$$\vec{X}_{i+1} \equiv \begin{pmatrix} u(i+1) \\ y(i+1) \end{pmatrix} = T\vec{X}_i \tag{3}$$

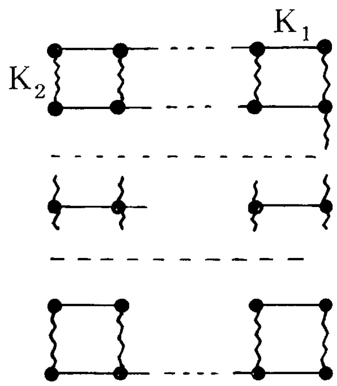
$$T = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\dfrac{m\omega^2}{K} & 1-\dfrac{m\omega^2}{K} \end{pmatrix} \tag{4}$$

となります。TはTransfer Matrix と呼ばれます。周期境界条件は$\vec{X}_{N+1} = H\vec{X}_1$（$H = T^N$ であり，従って $H - I = 0$ より固有振動数が求まります。

以上は最近接相互作用のみがある場合ですが，次近接相互作用がある場合には，Transfer Matrix の次元が大きくなります。[2] また，impurity を含んだ問題を取り扱う時には，Impurity の存在による Transfer Matrix の変化を考慮すれば充分です。Transfer Matrix による，一次元及び二次元の系で，isotopic impurity が free end にある時の計算結果のいくつかは以下のようです。[4]

一次元：


$Q = (M' - M)/M$ とすると $Q < -0.5$ の時band のmaximum frequencies がband の top より飛び出します。

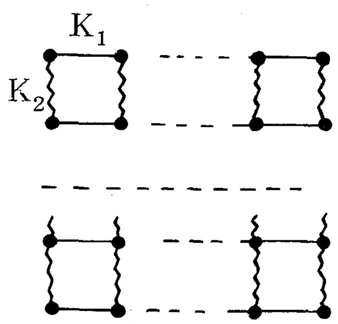
二次元：(A) 


〝表面〟の真中に impurity がある時。

$$Q_c = -\frac{1}{2}\,\frac{1-P^2}{1-\frac{2}{\pi}\sin^{-2}P}$$

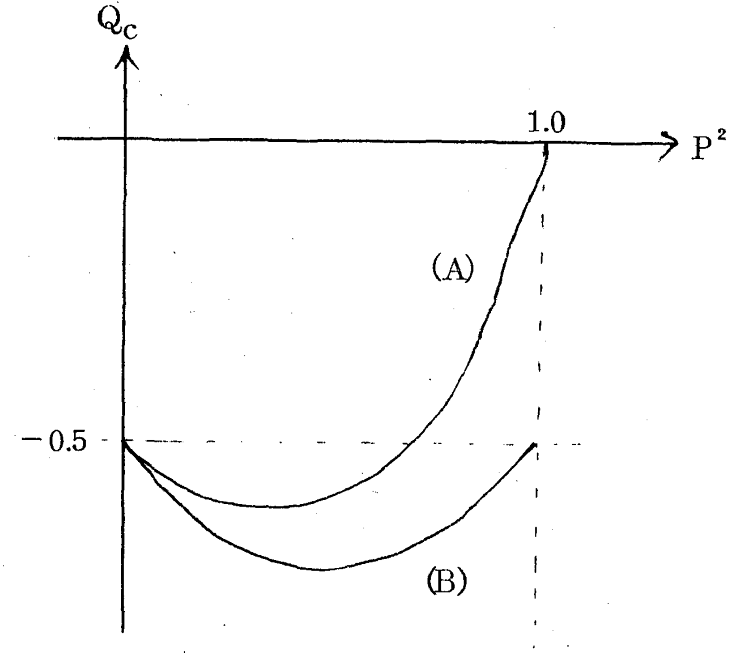
$$P = \sqrt{\frac{K_2}{K_1+K_2}}$$

(B)




〝表面〞の端に impurity がある時

$$Q_c = -\frac{1}{2}\,\frac{1-P^2}{1-\frac{2}{\pi}\left\{\frac{(1-P^2)^{1/2}}{P}-\frac{1-2P^2}{P^2}\sin^{-1}P\right\}}$$




## §3. Scattering Matrix

N 個の atoms が各々質量m を持ち，力定数K でつながる一次元鎖の運動方程式は (1) 式で与えられます。free end である場合には，右端の atom に対する運動方程式は

$$-M\omega^2 u(N) = K\{u(N-1) - u(N)\} \tag{5}$$

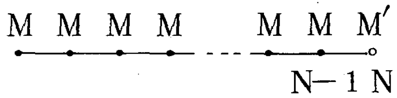
となります。今 $\omega^2 = (4K/M)\sin^2\beta$ と置き

$$u(n) = I\exp(2i\beta n) + R\exp(-2i\beta n) \tag{6}$$

なる形に解を仮定しますと，(5)式により

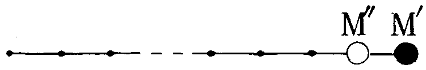
$$\frac{R}{I} = \frac{-\exp(4i\beta N)\left[\exp(i\beta) + Q\{\exp(i\beta) - \exp(-i\beta)\}\right]}{-\exp(-i\beta) + Q\{\exp(i\beta) - \exp(-i\beta)\}} \tag{7}$$

となり，(7)式の pole が，束縛状態（表面モード）を与えます。これは，最初から反射波のみが存在するとして計算することと等価です。[5] 表面モードのみを扱う時には，この計算方法は，Transfer Matrix によるよりも便利です。この方法による計算結果をいくつか示します。

①



$\beta = \frac{\pi}{2} + i\varepsilon$ と置いた時，表面モードに対して次の表式が導出されます。

$$1 + 2Q\cosh\varepsilon\,(\cosh\varepsilon - \sinh\varepsilon) = 0$$

②



$P \equiv \frac{M'}{M} = \frac{M''}{M}$ の時

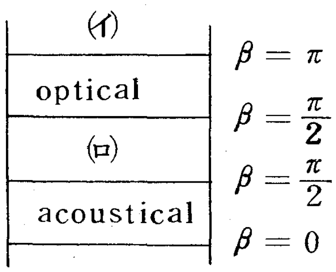
$\frac{2-\sqrt{2}}{4}M < M' < \frac{2+\sqrt{2}}{4}M < M$　　1個表面モード

これより軽い時　　2個表面モード

③



$Q \equiv \frac{M' - M_2}{M_2}$




(イ) optical branch の上

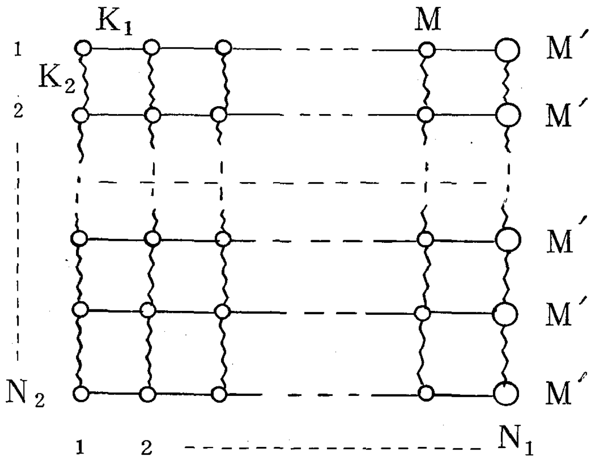
| | | |
|---|---|---|
| | $Q > -\frac{1}{2}$ | 解無し |
| | $-\frac{1}{2} > Q \geq -1$ | 解有り |

(ロ) band gap

| | | |
|---|---|---|
| $M_1 \geq M_2$ | $Q > -\frac{1}{2}$ | 解有り |
| | $-\frac{1}{2} > Q \geq -1$ | 解無し |
| $M_1 < M_2$ | $Q > -\frac{1}{2}$ | 解無し |
| | $-\frac{1}{2} > Q \geq -1$ | 解有り |

小野正利

④




$$Q = \frac{M' - M}{M}$$

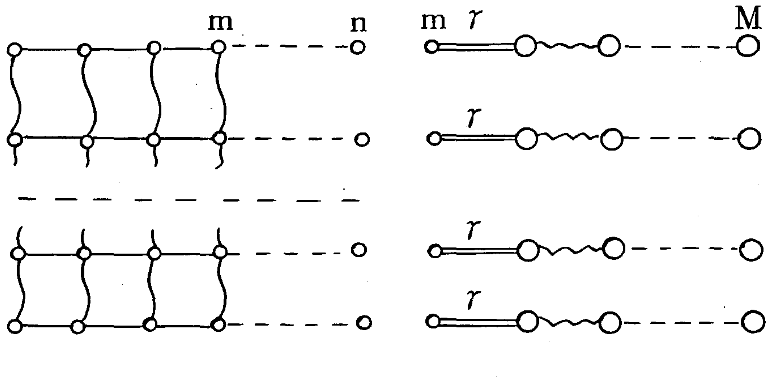
$$\beta_\mu = \frac{\pi}{2} + i\,\varepsilon_\mu$$

$$Q = -\frac{1}{2}\exp\varepsilon_\mu \cosh\varepsilon_\mu \Big/ \left\{\cosh^2 \varepsilon_\mu + \frac{K_2}{K_1}\sin^2\left(\frac{\mu\pi}{2N_2}\right)\right\}$$

以上，Transfer Matrix とScattering Matrixを用いた計算例を示しました。Transfer Matrix の長所は，摂動的方法や，直接の行列計算における不便さを解消しています。表面のモードを求めるという点からは，その等価性より，Scattering Matrix の方法を用います。界面を取り扱う時にも，Transfer Matrix の考え方は大変有用です。

## §3. 界　面

以前に，界面を取り扱う場合，我々はGreen 関数の方法を示し，それを解いてみました。



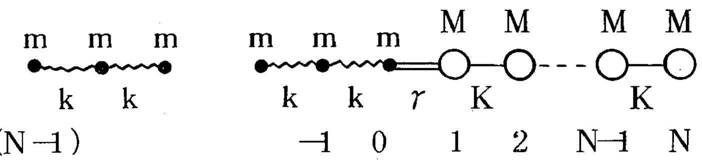

上図のような系に対しては，その振動状態は次のように書けます。[7)]

$$\{G_r^{1,1}(\omega^2;\mu\nu)+G_l^{0,0}(\omega^2;\mu\nu)\} = \frac{1}{\gamma} \tag{8}$$

$G_r$ は右の系，$G_l$ は左の系のGreen 関数であり，各Green 関数は，界面でもfree end の境界の条件を満たします。$\gamma$ は界面での力定数です。

この式は右側の解と，左側の解をつないだ結果として導びかれた式です。その際界面が平らである必要があります。欠陥が界面にある時には，解のつなぎ方が複雑になります。また，Green 関数自身global な性質を持ちますから，取り扱いに不便です。

そこで，Transfer Matrix で対応した式が導かれることを示します。次の一次元の〝界面〞を考えます，




左の系のTransfer Matrix $T_l$ を用いると

$$\begin{pmatrix} u(0) \\ u(1)-u(0) \end{pmatrix} = T_l^1 T_l^{N-1} \begin{pmatrix} u(-N) \\ u(-N+1)-u(-N) \end{pmatrix} \tag{9}$$

右の系のTransfer Matrix を用いて

$$\begin{pmatrix} u(1) \\ u(0)-u(1) \end{pmatrix} = T_\gamma^1 T_\gamma^{N-1} \begin{pmatrix} u(N+1) \\ u(N)-u(N+1) \end{pmatrix} \tag{10}$$

今，右端も，左端もfree end ですから

$$u(N)=u(N+1)\quad,\quad u(-N)=u(-N+1) \tag{11}$$

とすることができます。(9)，(10)，(11)式より，次の行列の要素の間の関係が成り立ちます。

$$\frac{(T_l^1 T_l^{N-1})_{11}}{(T_l^1 T_l^{N-1})_{21}} + \frac{(T_\gamma^1 T_\gamma^{N-1})_{11}}{(T_\gamma^1 T_\gamma^{N-1})_{21}} = -1 \tag{12}$$

(12)式は，State Ratio[2)] を用いることにより，更に分かりやすく表現することができます。State Ratio をZ で表わし $Z_i^\gamma = u(i+1)/u(i)$ とすれば，右側の格子系の運動方程式は

$$Z^{r}_{i-1} = \frac{1}{2-\dfrac{M\omega^2}{K}-Z^{r}_{i}} \tag{13}$$

と書けます。この式は，右の量が左の量を決めるという関係になっています。更に，$Z^{l}_{i} = u(i-1)/u(i)$ とすると，左側の格子系の運動方程式は

$$Z^{l}_{i+1} = \frac{1}{2-\dfrac{m\omega^2}{k}-Z^{l}_{i}} \tag{14}$$

となります。これは左の量から右の量が決まる関係を示します。従って，$u(2)/u(1)$ は右端のState Ratio により，また，$u(-1)/u(0)$ は左端のState Ratioより決まるとすれば，変位 $u(1)$，$u(0)$ に対して，次のような方程式がそれぞれ成り立ちます。

$$-M^{r}\omega^2 u(1) = r(u(0)-u(1))$$

$$M^{r} = \frac{M\omega^2 + K\dfrac{u(2)}{u(1)} - K}{\omega^2} \tag{15}$$

$$-M^{l}\omega^2 u(0) = r(u(1)-u(0))$$

$$M^{l} = \frac{m\omega^2 + k\dfrac{u(-1)}{u(0)} - k}{\omega^2} \tag{16}$$

(15)，(16) 式より次の関係式が得られます，

$$\frac{1}{M^{l}\omega^2} + \frac{1}{M^{r}\omega^2} = \frac{1}{r} \tag{17}$$

これは，Green 関数による(8)式と全く同じ形をしています。(15)式，(16)式は，左側のatoms の鎖にとって，右側の鎖が一つの fictitious mass $M^{r}$ に等しく見える事を示し，また，$M^{l}$ については，その反対のことが言えることを示しています。結局，Green 数によって表現した表式は，同じく，Transfer Matrixでも可能となり，それは一つの

fictitious mass を導入することに相当します。Transfer Matrix の方法は，界面に欠陥がある時には，その領域のみを，欠陥を表現するTransfer Matrix で取り扱い，その他の領域は，一つの fictitious mass を仮定すればよいことを示し，Green 関数による取り扱いよりも便利です。

## 参考文献


1) E.H.Kerner : Phys. Rev. 95 (1954), 687

: Proc. Pnys. Soc. London 694 (1956), 234

2) J.Hori and T.Asahi

: Prog. Theor. Phys. 17 (1957) 523

J.Hori : Spectral Properties of Disordered Chains and Lattices (Pergamon Press―Oxford, 1968)

3) E.W.Montroll and R.B.Potts

: Phys. Rev. 100 (1955) 525

4) T.Asahi : J. Res. Inst. Catalysis, Hokkaido Univ. X1 (1964), 133

5) Y. Fukuda : J. Phys. Soc. Japan 17 (1962) 766

6) M. Fukushima : Prog. Theor. Phys. 33 (1965) 624

7) J.Hori, M.Ono, M.Ogura and K.Wada

: Proc. Int. Conf. Rennes, France 1971. P. 400